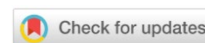
ИНФОРМАТИКА, ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА И УПРАВЛЕНИЕ
INFORMATION TECHNOLOGY, COMPUTER SCIENCE AND MANAGEMENT





УДК 004.942, 004.02, 519.622, 544.3, 544.2
https://doi.org/10.23947/2687-1653-2024-24-1-109-118

Научная статья

Расчет оптимальной температуры при многокритериальной оптимизации процесса гидрирования полициклических ароматических углеводородов методом NSGA-II



EDN: VNTDAG

А.А. Александрова ✉, **С.Н. Коледин**
Уфимский государственный нефтяной технический университет, г. Уфа, Российская Федерация
✉ nastena1425@gmail.com

Аннотация

Введение. Многокритериальную оптимизацию с учетом противоречащих друг другу критериев задействуют для улучшения эффективности производства, сокращения затрат, повышения качества продукции и экологической безопасности процессов. В литературе описано использование многокритериальной оптимизации для производственных целей, в том числе при выборе условий реакции и улучшении технологических процессов. В представленной работе объект исследования — это процесс гидрирования полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) при получении высокоплотных топлив. Для определения оптимальных условий процесса решается задача многокритериальной оптимизации на основе кинетической модели. Критерии: максимизация выхода целевых нафтенов и конверсия исходного сырья. Цель работы — создание программы, реализующей алгоритм многокритериальной оптимизации NSGA-II (англ. non-dominated sorting genetic algorithm II). Благодаря этому на основе кинетической модели можно рассчитать оптимальную температуру для процесса гидрирования ПАУ.

Материалы и методы. Для решения многокритериальной задачи оптимизации применялся генетический алгоритм NSGA-II. Используется также измененный отбор родителей и выживания в рамках фронта Парето. При необходимости разделения фронта решения выбирались по манхэттенскому расстоянию между ними. Программа реализована на языке Python.

Результаты исследования. В системе обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений химической кинетики концентрацию обозначили y_i, условное время контакта реакционной смеси с катализатором — τ. Систему решили для реакции гидрирования полициклических ароматических углеводородов. Расчеты показали, что при $\tau = 0$ $y_1(0) = 0{,}025$; $y_2(0) = 0{,}9$; $y_6(0) = 0{,}067$; $y_9(0) = 0{,}008$; $y_i(0) = 0$, $i = 3–5,7,8,10–20$; $Q(0) = 1$. В качестве управляемого параметра рассматривали температуру процесса по двум критериям оптимальности: максимизация выхода целевых нафтенов (f_1) в конце реакции и максимизация конверсии исходного сырья (f_2). Значения f_1 были в границах 0,43–0,79; конверсии — 0,01–0,03; температуры — 200–300 K. Рост температуры сопровождается увеличением выхода целевых нафтенов и снижением конверсии исходного сырья. Каждое полученное решение — неулучшаемое. При моделировании процесса гидрирования ПАУ запустили алгоритм с размером популяции — 100, количеством поколений — 100. Разработана программа, реализующая алгоритм NSGA-II. Рассчитано оптимальное множество значений температуры реакции гидрирования ПАУ, позволяющее получить неулучшаемые значения критериев оптимальности — максимизации выхода целевых нафтенов и конверсии исходного сырья.

Обсуждение и заключение. Алгоритм NSGA-II эффективен для решения задачи недоминирования и вывода оптимального решения для всех критериев. Будущие исследования следует посвятить подбору оптимальных параметров алгоритма, позволяющих увеличить скорость решения. Опираясь на полученные теоретические оптимальные условия реакции гидрирования ПАУ, можно реализовать процесс в промышленности.

Ключевые слова: гидрирование полициклических ароматических углеводородов, многокритериальная оптимизация технологического процесса, задача нелинейного программирования, фронт Парето, метод NSGA-II

Благодарности. Авторы выражают признательность рецензентам за ценные замечания, способствовавшие улучшению статьи.

Для цитирования. Александрова А.А., Коледин С.Н. Расчет оптимальной температуры при многокритериальной оптимизации процесса гидрирования полициклических ароматических углеводородов методом NSGA-II. *Advanced Engineering Research* (*Rostov-on-Don*). 2024;24(1):109–118. https://doi.org/10.23947/2687-1653-2024-24-1-109-118

Research article

Optimal Temperature Calculation for Multicriteria Optimization of the Hydrogenation of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons by NSGA-II Method

Anastasiya A. Alexandrova, **Sergey N. Koledin**
Ufa State Petroleum Technical University, Ufa, Russian Federation
nastena1425@gmail.com

Abstract

Introduction. Multicriteria optimization, taking into account contradicting criteria, is used to improve production efficiency, reduce costs, improve product quality and environmental safety of processes. The literature describes the application of multicriteria optimization for production purposes, including the selection of reaction conditions and improvement of technological processes. In the presented paper, the object of research is the process of hydrogenation of polycyclic aromatic hydrocarbons (PAH) in the production of high-density fuels. To determine the optimal conditions of the process, the problem of multicriteria optimization based on the kinetic model is solved. The criteria include maximizing the yield of targeted naphthenes and conversion of feedstock. The research objective is to create a program implementing the multicriteria optimization non-dominated sorting genetic algorithm-II (NSGA-II). Due to this, it is possible to calculate the optimal temperature for the PAH hydrogenation process on the basis of the kinetic model.

Materials and Methods. The NSGA-II genetic algorithm was used to solve the multicriteria optimization problem. Modified parental and survival selection within the Pareto front was also used. If it was necessary to divide the front, solutions based on the Manhattan distance between them were selected. The program was implemented in Python.

Results. In the system of ordinary nonlinear differential equations of chemical kinetics, the concentration was designated y_i, the conditional contact time of the reaction mixture with the catalyst — τ. The system was solved for the hydrogenation reaction of polycyclic aromatic hydrocarbons. The calculations showed that at $\tau = 0$ $y_1(0) = 0.025$; $y_2(0) = 0.9$; $y_6(0) = 0.067$; $y_9(0) = 0.008$; $y_i(0) = 0$, $i = 3–5, 7, 8, 10–20$; $Q(0) = 1$. The process temperature was considered as a control parameter according to two optimality criteria: maximizing the yield of target naphthenes (f_1) at the end of the reaction, and maximizing the conversion of feedstock (f_2). Values f_1 were in the range of 0.43–0.79; conversion — 0.01–0.03; temperature — 200–300 K. The growth of temperature was accompanied by an increase in the yield of target naphthenes and a decrease in the conversion of feedstock. Each solution obtained was not an unimprovable one. When modeling the process of hydrogenation of PAH, an algorithm was launched with a population size of 100 and a number of generations of 100. A program implementing the NSGA-II algorithm was developed. The optimal set of values of the PAH hydrogenation reaction temperature was calculated, which made it possible to obtain unimprovable values of the optimality criteria — maximizing the yield of target naphthenes and conversion of feedstock.

Discussion and Conclusion. The NSGA-II algorithm is effective for solving the problem of non-dominance, and deriving the optimal solution for all criteria. Future research should be devoted to the selection of optimal algorithm parameters to increase the speed of the solution. Based on the obtained theoretical optimal conditions of the PAH hydrogenation reaction, it is possible to implement the process in industry.

Keywords: hydrogenation of polycyclic aromatic hydrocarbons, multicriteria process optimization, nonlinear programming problem, Pareto front, NSGA-II method

Acknowledgements. The authors would like to thank the reviewers for valuable comments that contributed to the improvement of the article.

For citation. Alexandrova AA, Koledin SN. Optimal Temperature Calculation for Multicriteria Optimization of the Hydrogenation of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons by NSGA-II Method. *Advanced Engineering Research* (*Rostov-on-Don*). 2024;24(1):109–118. https://doi.org/10.23947/2687-1653-2024-24-1-109-118

Введение. Оптимизация многостадийных реакций применяется в химической, нефтегазовой, пищевой и других отраслях промышленности. На практике задачи оптимизации — многокритериальные, причем критерии зачастую противоречивы и имеют оптимум в разных точках. Многокритериальная оптимизация сохраняет актуальность, так как позволяет учитывать несколько параметров и выбирать наилучшее решение из множества вариантов.

В рамках данной работы объект исследования — каталитическая реакция гидрирования полициклических ароматических углеводородов (ПАУ). Они представляют собой класс органических соединений, молекулы которых содержат не менее двух бензольных колец [1]. ПАУ распространены в межзвездной среде, входят в состав тяжелых фракций нефти, образуются при лазерном облучении углеродных материалов. Изучение этих соединений интересно с точки зрения выявления зависимостей между их химическим строением и физико-химическими свойствами. Кроме того, данные, полученные в результате таких научных изысканий, можно задействовать для создания новых органических и гибридных соединений с прочным углеродным каркасом, которые применимы в наноархитектонике.

Прикладная наука соотносит наличие ПАУ с целями производства. Например, желательно присутствие ПАУ в сырье, если оно используется для получения кокса с заданной структурой [2]. Однако при производстве топлива ПАУ может негативно сказаться на эксплуатационных характеристиках продукта, например на плотности [3].

К выработке высокоплотного реактивного топлива предъявляются крайне серьезные требования. При высокой плотности оно должно иметь температуру кипения не выше верхней границы температуры кипения керосиновой фракции. Другой обязательный критерий — низкое содержание ароматических углеводородов. Отметим также дороговизну известных технологий получения высокоплотных топлив.

Учитывая сказанное, задачу необходимо решать по принципу доминирования Парето для определения множества неулучшаемых вариантов с применением генетического алгоритма недоминируемой сортировки [4].

Цель исследования — разработка программы, реализующей алгоритм многокритериальной оптимизации NSGA-II (Non-dominated sorting genetic algorithm II) и позволяющей на основе кинетической модели рассчитать оптимальную температуру для процесса гидрирования ПАУ.

Материалы и методы

Математическая модель. Опишем изменения концентраций компонентов в зависимости от времени реакций. Для этого используются уравнения химической кинетики, которые представляют собой систему обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ):

$$\frac{dy_i}{d\tau} = \sum_{j=1}^{J} \nu_{ij} w_j, i = 1,...I, \tag{1}$$

$$w_j = k_j \cdot \prod_{i=1}^{I} (y_i)^{|\alpha_{ij}|} - k_{-j} \cdot \prod_{i=1}^{I} (y_i)^{\beta_{ij}}, k_j = A_j \cdot exp\left(-\frac{E_j^{+}}{RT}\right), k_{-j} = A_{-j} \cdot exp\left(-\frac{E_j^{-}}{RT}\right). \tag{2}$$

Здесь начальные условия: $y_i(0) = y_i^0$ при $\tau = 0$; $\tau \in [0, \tau^*]$; y_i — концентрации реагентов, молярные доли; τ — условное время контакта реакционной смеси с катализатором, кг·мин/моль; J — количество стадий; I — количество веществ; ν_{ij} — стехиометрическая матрица; w_j — скорость j-й стадии, 1/мин или моль/(кг·мин); k_j, k_{-j} — константы скоростей стадий (приведенные), 1/мин; α_{ij} — отрицательные элементы матрицы ν_{ij}; β_{ij} — положительные элементы ν_{ij}; A_j, A_{-j} — предэкспоненциальные множители, 1/мин; E_j^+, E_j^- — энергии активации прямой и обратной реакций, ккал/моль; R — газовая постоянная, 2 кал/(моль·K); T — температура, K; τ^* — продолжительность реакции, кг·мин/моль.

Модель каталитического гидрирования ПАУ учитывает динамику мольного состава и объема реакционной смеси. Следовательно, принимаются во внимание изменения концентрации компонентов в каждый момент времени [3]:

$$\frac{dQ}{d\tau} = \sum_{i=1}^{I} \frac{dy_i}{d\tau}, \quad Q(0) = Q^0,$$
$$w_j = k_j \cdot \prod_{i=1}^{I} (\frac{y_i}{Q})^{|\alpha_{ij}|} - k_{-j} \cdot \prod_{i=1}^{I} (\frac{y_i}{Q})^{\beta_{ij}}. \tag{3}$$

Для описания нестационарной реакции, которая происходит с изменением объема реакционной смеси, необходимо решить систему нелинейных дифференциальных уравнений в каждый момент времени. Прямая кинетическая задача представляет собой решение СОНДУ (1)–(3).

В процессе гидрирования полициклических ароматических углеводородов из исходных ароматических углеводородов получают нафтены, которые обладают более высокой плотностью и могут использоваться в качестве топлива для реактивных ракет. С этой целью применяются никелевые катализаторы, а управляющим

или варьируемым параметром является температура процесса, которая должна быть в пределах 200–500 К. Критерии оптимальности — максимизация выхода целевых нафтенов в конце реакции и максимизация конверсии исходного сырья.

Алгоритм исследования. Многокритериальная оптимизация — это выбор из множества альтернатив наилучшего решения с учетом нескольких критериев. Важность каждого из них определяется весом (приоритетом).

Допустим, $f(x)$ — это целевая функция, а ограничения, заданные в виде равенств $h_1(x)\ldots h_m(x)$ и неравенств $g_{m+1}(x)\ldots g_p(x)$, представлены вектором-столбцом компонент $x = [x_1,\ldots, x_n]^T$ в n-мерном Евклидовом пространстве.

Сформулируем задачу нелинейного программирования [5].

Оптимизировать

$$f(x) \to extr,\ x \in E^n, \tag{4}$$

при m линейных или нелинейных ограничениях в виде равенств:

$$h_j(x) = 0,\ j = 1,\ldots,m, \tag{5}$$

и при $(p - m)$ линейных или нелинейных ограничениях в виде неравенств:

$$g_j(x) \ge 0,\ j = m+1,\ldots,p. \tag{6}$$

Декомпозиция (4)–(6) представляет собой постановку и решение задачи линейного и квадратичного программирования. Каждая из них определяется видом уравнений (4)–(6). Так, в случае квадратичной функции (4) и линейных уравнений (5), (6) — это описанная ниже задача квадратичного программирования.

Определим экстремум функции

$$f(x) = a_0 + c^T x + x^T Qx \to extr, \tag{7}$$

с ограничениями:

$$a^T x \ge b,\ x \ge 0. \tag{8}$$

В уравнениях (7), (8) Q — неотрицательно определенная квадратичная симметричная матрица; a, b, c — матрицы коэффициентов.

При постановке многокритериальной Паретовой задачи оптимизации (4)–(6) будет иметь вид:

$$extrF(x) = F(x^*) = F^*. \tag{9}$$

В уравнении (9) $Fx = \left(f_1(X), f_2(X),\ldots, f_m(X)\right)$ — вектор-функция критериев оптимальности f_1 и f_2. Множество x^* — искомое решение задачи в области параметров варьирования. Множество F^* представляет собой искомое решение задачи в области критериев оптимальности, неулучшаемое в смысле аппроксимации Парето. Тогда x^* определяет множество Парето, F^* — фронт Парето.

Для решения (9) применили априорные и апостериорные алгоритмы аппроксимации Парето. Один из них — метод идеальной точки, которая представляет собой лучшее решение по всем критериям [6]. Чтобы ее найти, нужно сначала определить минимальные и максимальные значения каждого критерия всех рассматриваемых решений. Затем для каждого критерия выбирается максимальное значение из всех минимальных и минимальное из всех максимальных.

Однако у данного подхода есть недостатки. Во-первых, он может быть неэффективным, если идеальная точка находится вне области допустимых значений критериев. В таком случае используются другие методы решения задач многокритериальной оптимизации. Кроме того, метод идеальной точки не учитывает взаимосвязь между критериями и может привести к выбору компромиссного решения, которое не является оптимальным по всем критериям. Поэтому при использовании данного метода необходимо дополнительно анализировать и проверять оптимальность полученных решений [7].

В решении задач многокритериальной оптимизации используется также метод лексикографического упорядочивания. При этом критерии упорядочиваются по приоритету и рассматриваются последовательно. Если решения не могут быть отсортированы по первому критерию, то они сортируются по следующему критерию и т. д. [7]. Преимущества лексикографического упорядочивания — простота и прозрачность. С помощью этого метода можно получить единственное оптимальное решение, которое легко интерпретируется. Что касается недостатков, отметим, во-первых, невозможность учесть компромиссные решения, которые могут оказаться оптимальными по всем критериям. Во-вторых, есть риск выбора невыгодного решения, если первый критерий имеет большой вес, но не является самым важным для данной задачи [8].

В представленной работе приводится решение задачи многокритериальной оптимизации процесса гидрирования полициклических ароматических углеводородов с применением известного метода NSGA-II. Он

основан на генетическом алгоритме и использует несколько техник для решения проблемы недоминирования [9]. Ниже описаны основные шаги алгоритма [10].

1. Инициализация популяции. Начальная популяция создается случайным образом.
2. Оценка популяции. Каждый элемент популяции оценивается по нескольким критериям.
3. Сортировка популяции. Элементы популяции сортируются по уровню недоминирования. Доминирующие и не испытывающие доминирования (недоминируемые) элементы помещаются в первый уровень. Элементы, доминируемые только элементами первого уровня, помещаются во второй уровень, и т. д.
4. Выбор родительских элементов. Для создания новой популяции выбираются родительские элементы из нескольких первых уровней.
5. Кроссинговер и мутация. Родительские элементы проходят кроссинговер и мутацию, чтобы создать новые элементы популяции.
6. Оценка новой популяции. Новые элементы оцениваются по критериям.
7. Сортировка новой популяции. Новые элементы сортируются по уровню недоминирования.
8. Выбор новой популяции. Из новой популяции выбираются элементы для следующего поколения.
9. Повторение шагов 4–8 до достижения критерия остановки.

NSGA-II позволяет точно и оперативно работать с задачами многокритериальной оптимизации. Он эффективно решает проблему недоминирования, что позволяет получать оптимальные решения для всех критериев.

NSGA-II основан на генетическом алгоритме с отбором родителей и выживания. Особи выбираются по фронтам, при этом фронт разделяется, если не все особи могут выжить. Решения в разделенном фронте выбираются на основе расстояния между ними, которое является манхэттенским расстоянием в пространстве критериев [9]. Крайние точки сохраняются на каждом поколении и им присваивается условно бесконечное расстояние для использования в последующих итерациях [11] (рис. 1).

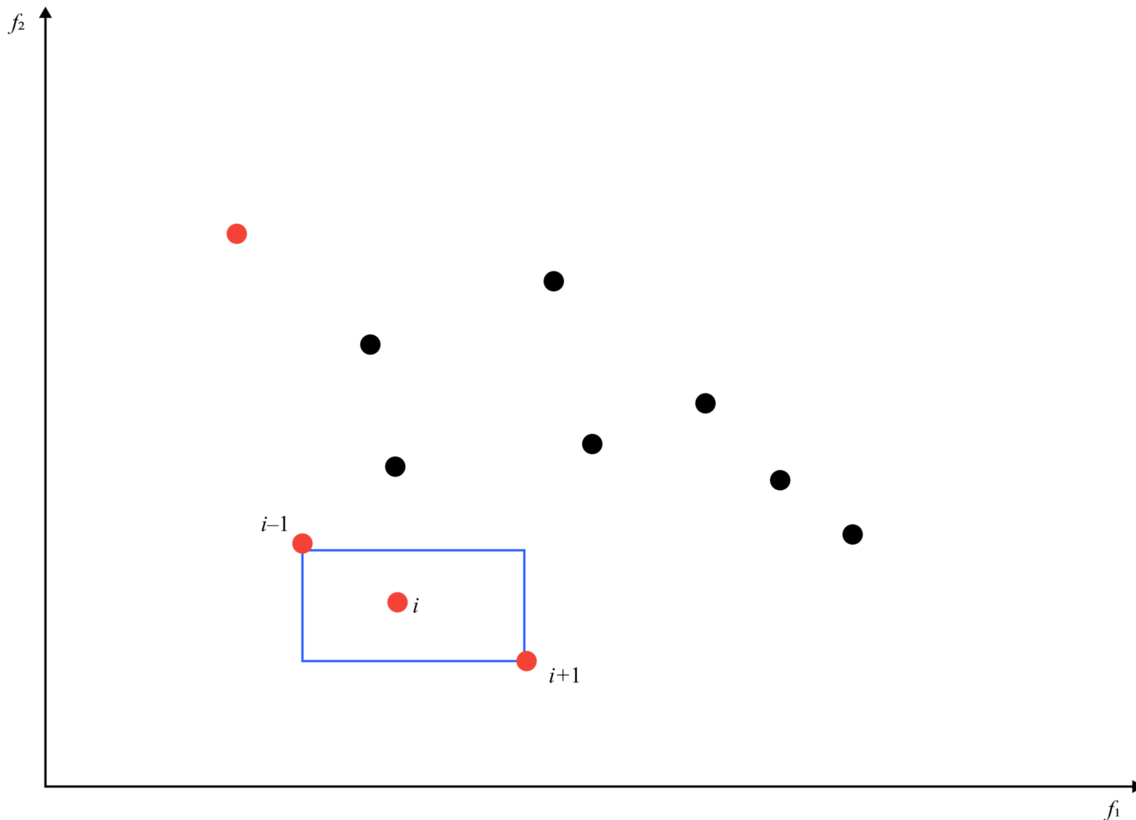


Рис. 1. Визуализация фронта Парето и выбора решений на основе расстояний

На рис. 1 — пример множества решений для задачи многокритериальной оптимизации с использованием критериев f_1 и f_2. Красные точки обозначают фронт Паретто. Показан расчет расстояния скопления для решения i — это средняя длина стороны кубоида, в котором находится решение i (отмечено синей рамкой).

Для усиления воздействия на отбор родителей NSGA-II использует двоичный турнирный отбор [9]. Каждая особь сначала сравнивается по рангу, а затем по расстоянию между ними.

Результаты исследования. Программа, реализующая алгоритм решения задачи многокритериальной оптимизации, написана на языке Python.

В ходе исследования решена система дифференциальных уравнений (1–3). Для реакции гидрирования полициклических ароматических углеводородов она имеет вид [12]:

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{d\tau} = \left(-w_1 - w_2 + w_{11}\right) \\ \frac{dy_2}{d\tau} = -3w_1 - w_2 - 2w_3 - 3w_4 - 3w_5 - 3w_6 - w_7 \\ -w_8 - 3w_9 - w_{10} - w_{11} - w_{12} - w_{14} - w_{15} \\ \frac{dy_3}{d\tau} = w_1 \\ \frac{dy_4}{d\tau} = w_2 + w_8 - w_9 \\ \frac{dy_5}{d\tau} = w_2 \\ \frac{dy_6}{d\tau} = -w_3 + w_{16} \\ \frac{dy_7}{d\tau} = w_3 - w_9 - w_{10} - 2w_{16} \\ \frac{dy_8}{d\tau} = w_4 + w_{16} \\ \frac{dy_9}{d\tau} = -w_5 + w_{17} \\ \frac{dy_{10}}{d\tau} = w_5 - w_6 - w_8 - 2w_{17} \\ \frac{dy_{11}}{d\tau} = w_6 - w_7 + w_{17} \\ \frac{dy_{12}}{d\tau} = w_7 + w_7 + w_8 + w_9 - w_{13} - w_{15} \\ \frac{dy_{13}}{d\tau} = 0 \\ \frac{dy_{14}}{d\tau} = 0 \\ \frac{dy_{15}}{d\tau} = 0 \\ \frac{dy_{16}}{d\tau} = w_{10} - w_{11} - w_{12} \\ \frac{dy_{17}}{d\tau} = w_{12} \\ \frac{dy_{18}}{d\tau} = w_{13} - w_{14} \\ \frac{dy_{19}}{d\tau} = w_{14} \\ \frac{dy_{20}}{d\tau} = w_{15} \\ \frac{dQ}{d\tau} = \sum_{i=1}^{20} \frac{dy_i}{d\tau} \end{cases}, \qquad \begin{cases} w_1 = \frac{k_i y_1 \cdot y_2^3}{Q^3} - \frac{k_{21} \cdot y_3}{Q} \\ w_2 = \frac{k_2 \cdot y_1 \cdot y_2}{Q^2} \\ w_3 = \frac{k_3 \cdot y_6 \cdot y_2^2}{Q^3} - \frac{k_{18} \cdot y_7}{Q} \\ w_4 = \frac{k_4 \cdot y_7 \cdot y_2^3}{Q^4} \\ w_5 = \frac{k_5 \cdot y_9 \cdot y_2^3}{Q^4} - \frac{k_{19} \cdot y_{10}}{Q} \\ w_6 = \frac{k_6 \cdot y_{10} \cdot y_2^3}{Q^4} - \frac{k_{19} \cdot y_{10}}{Q} \\ w_7 = \frac{k_7 \cdot y_{11} \cdot y_2}{Q^2} \\ w_8 = \frac{k_8 \cdot y_{10} \cdot y_2}{Q^2} \\ w_9 = \frac{k_9 \cdot y_4 \cdot y_2^3}{Q^4} \\ w_{10} = \frac{k_{10} \cdot y_7 \cdot y_2}{Q^2} \\ w_{11} = \frac{k_{11} \cdot y_{16} \cdot y_2}{Q^2} \\ w_{12} = \frac{k_{12} \cdot y_{16} \cdot y_2}{Q^2} \\ w_{13} = \frac{k_{13} \cdot y_{12}}{Q} \\ w_{14} = \frac{k_{14} \cdot y_{18} \cdot y_2}{Q^2} \\ w_{15} = \frac{k_{15} \cdot y_{12} \cdot y_2}{Q^2} \\ w_{16} = \frac{k_{16} \cdot y_7^3}{Q^2} \\ w_{17} = \frac{k_{17} \cdot y_{10}^2}{Q^2} \end{cases}.$$

При $\tau = 0$; $y_1(0) = 0{,}025$; $y_2(0) = 0{,}9$; $y_6(0) = 0{,}067$; $y_9(0) = 0{,}008$; $y_i(0) = 0$, $I = 3–5,7,8,10–20$; $Q(0) = 1$.

На рис. 2 приведено рассчитанное множество решений, удовлетворяющих ограничениям системы, и фронт Парето, где f_1 — это выход целевых нафтенов, а f_2 — конверсия исходного сырья.

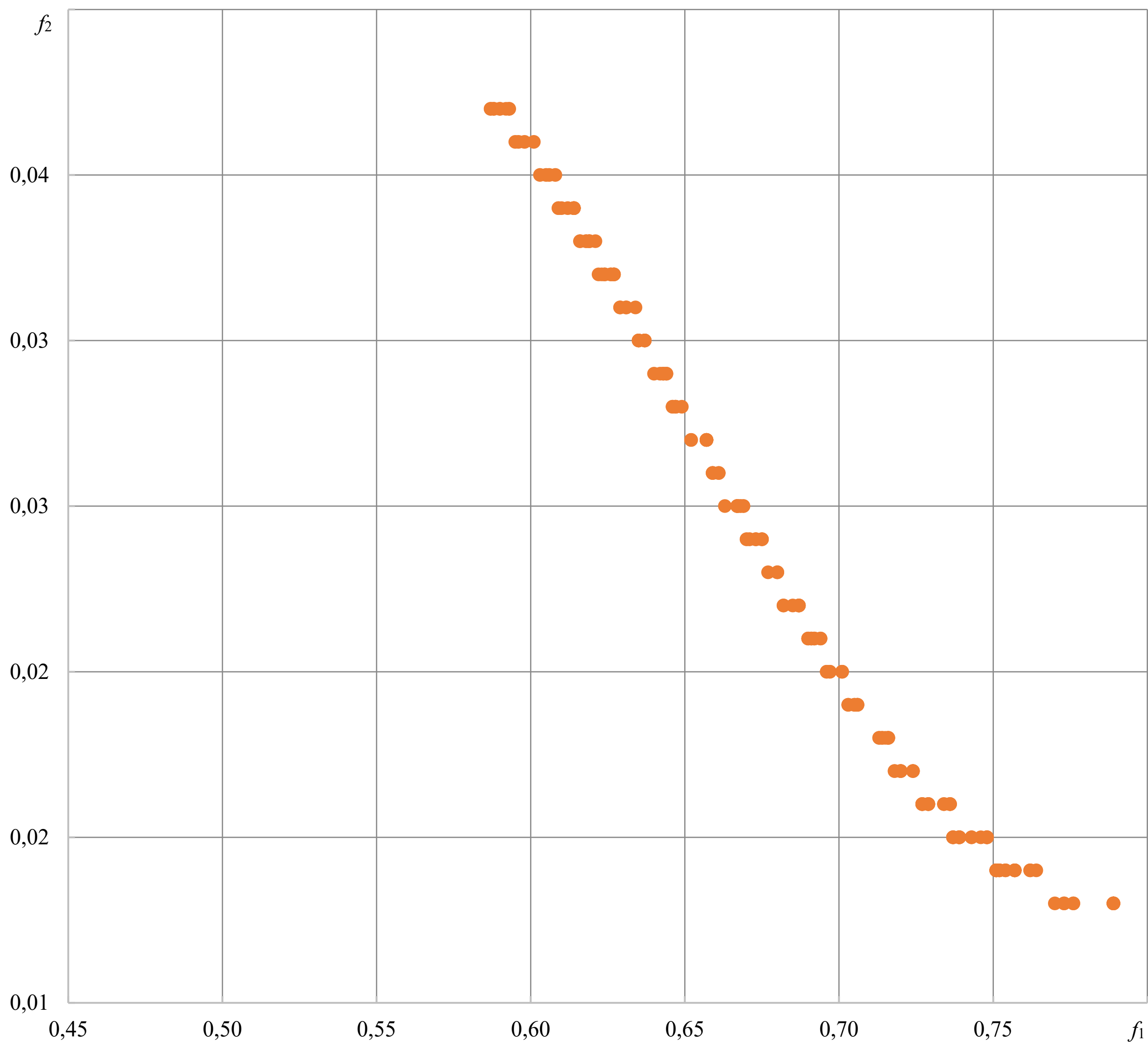


Рис. 2. Фронт Парето процесса гидрирования полициклических ароматических углеводородов

Управляемый параметр — температура процесса [13]. Критерии оптимальности — максимизация выхода целевых нафтенов в конце реакции и максимизация конверсии исходного сырья [14]. Расчеты по предлагаемому алгоритму дали результаты соответствия критериев оптимальности и значений параметра температуры, которые обобщены в таблице 1.

Таблица 1

Соответствие критериев оптимальности и значения параметра температуры процесса гидрирования полициклических ароматических углеводородов

Выход целевых нафтенов f_1	Конверсия исходного сырья f_2	Температура T, K
0,43	0,03	200,00
0,59	0,03	221,20
0,71	0,01	250,00
0,76	0,01	271,10
0,79	0,01	300,00

Итак, при увеличении температуры выход целевых нафтенов увеличивается, а конверсия исходного сырья уменьшается. Каждое из этих решений является неулучшаемым, выбор конкретных значений зависит от лица, принимающего решение.

Для успешной работы NSGA-II необходимо правильно выбирать параметры алгоритма. В частности, следует оптимизировать критерии размера популяции, количества поколений, вероятности кроссинговера и мутации.

При запуске алгоритма на модели процесса гидрирования полициклических ароматических углеводородов использовались следующие параметры: размер популяции — 100, количество поколений — 100. Недостаточно большая популяция может обусловить преждевременную сходимость алгоритма к локальному оптимуму. Слишком большая способна замедлить процесс оптимизации [15]. Чрезмерное количество поколений потенциально ведет к переобучению алгоритма, тогда как при недостаточном количестве поколений может не хватить времени для достижения оптимальных решений.

Обсуждение и заключение. Создана программа, реализующая алгоритм многокритериальной оптимизации NSGA-II. Работа с соответствующей задачей в рамках этого метода включает решение системы дифференциальных уравнений, визуализацию множества решений, удовлетворяющих ограничениям системы, и построение фронта Парето. Кроме того, найдены значения варьируемых параметров для достижения целей оптимизации. Для процесса гидрирования ПАУ на основе кинетической модели рассчитано множество значений температуры, оптимальных для получения неулучшаемых значений двух критериев оптимальности: выход нафтенов и конверсия исходного сырья. С повышением температуры растет скорость реакции и выход нафтенов. Однако уменьшается конверсия сырья. К тому же слишком высокие температуры могут стать причиной побочных реакций и разложения продуктов.

Данные, полученные в рамках представленной работы, могут быть полезны для оптимизации процесса гидрирования ПАУ в промышленных условиях. Важно учитывать влияние температуры на выход нафтенов и конверсию сырья при разработке стратегии производства. Кроме того, следует принимать во внимание и другие параметры, от которых зависит кинетика реакции. Это, например, давление, скорость потока реагентов и роль катализаторов.

Таким образом, разработанная программа и предложенный алгоритм позволяют проводить одновременный анализ нескольких критериев оптимальности процесса на основе кинетической модели и формировать множество неулучшаемых значений варьируемых параметров.

Список литературы / References

1. Ахметов А.Ф., Ахметов А.В., Загидуллин Ш.Г., Шайжанов Н.С. Гидропереработка тяжелой фракции ароматических углеводородов C_{10+} на катализаторе никель на кизельгуре. *Башкирский химический журнал*. 2018;25(1):96–98. https://doi.org/10.17122/bcj-2018-1-96-98

Akhmetov AF, Akhmetov AV, Zagidullin ShG, Shayzhanov NS. Hydrofinery Processing Heavy Fraction of Aromatic Hydrocarbons C_{10+} on Catalyzer Nickel on Kizelgur. *Bashkir Chemical Journal*. 2018;25(1):96–98. https://doi.org/10.17122/bcj-2018-1-96-98

2. Ахметов А.Ф., Ахметов А.В., Шайжанов Н.С., Загидуллин Ш.Г. Гидропереработка остаточных фракций процесса пиролиза. *Башкирский химический журнал*. 2017;24(2):29–32. URL: https://bcj.rusoil.net/files/slider/BCJ-2-2017.pdf (дата обращения: 07.11.2023).

Akhmetov AF, Akhmetov AV, Shayzhanov NS, Zagidullin ShG. Hydrogenolysis of Residual Fractions Obtained by Pyrolysis Process. *Bashkir Chemical Journal*. 2017;24(2):29–32. URL: https://bcj.rusoil.net/files/slider/BCJ-2-2017.pdf (accessed: 07.11.2023).

3. Шайжанов Н.С., Загидуллин Ш.Г. Ахметов А.В. Анализ активности катализаторов гидрирования в процессе получения высокоплотных реактивных топлив. *Башкирский химический журнал*. 2014;21(2):94–98. URL: https://cyberleninka.ru/article/n/analiz-aktivnosti-katalizatorov-gidrirovaniya-v-protsesse-polucheniya-vysokoplotnyh-reaktivnyh-topliv/viewer (дата обращения: 07.11.2023).

Shayzhanov NS, Zagidullin ShG, Akhmetov AV. Activity Analysis of Hydrogenation Catalysts in the Process of High-Density Jet Fuels Production. *Bashkir Chemical Journal*. 2014;21(2):94–98. URL: https://cyberleninka.ru/article/n/analiz-aktivnosti-katalizatorov-gidrirovaniya-v-protsesse-polucheniya-vysokoplotnyh-reaktivnyh-topliv/viewer (accessed: 07.11.2023).

4. Koledina KF, Koledin SN, Karpenko AP, Gubaydullin IM, Vovdenko MK. Multi-Objective Optimization of Chemical Reaction Conditions Based on a Kinetic Model. *Journal of Mathematical Chemistry*. 2019;57(2):484–493. https://doi.org/10.1007/s10910-018-0960-z

5. Emmerich M, Deutz A. *Multicriteria Optimization and Decision Making: Master Course*. Leiden: Leiden University Publishing; 2014. 102 p. URL: https://liacs.leidenuniv.nl/~emmerichmtm/modapage/MCOReaderEmmeirchDeutz2017.pdf (accessed: 17.11.2023).

6. Deb K, Mohan M, Mishra S. Towards a Quick Computation of Well-Spread Pareto-Optimal Solutions. In book: CM Fonseca, PJ Fleming, E Zitzler, L Thiele, K Deb (eds). *Evolutionary Multi-Criterion Optimization*. Berlin, Heidelberg: Springer; 2003. P. 222–236. https://doi.org/10.1007/3-540-36970-8_16

7. Коледина К.Ф., Многокритериальная интервальная оптимизация химических реакций на основе кинетической модели. *Математическое моделирование*. 2022;34(8):97–109. https://doi.org/10.20948/mm-2022-08-06

Koledina KF. Multi-Criteria Interval Optimization of Conditions for Complex Chemical Reactions on the Basis of a Kinetic Model. *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2022;34(8):97–109. https://doi.org/10.20948/mm-2022-08-06

8. Miernik K, Węglińska E, Danek T, Leśniak A. An Application of the NSGA-II Algorithm in Pareto Joint Inversion of 2D Magnetic and Gravity Data. *Geology Geophysics & Environment*. 2021;47(2):59–70. https://doi.org/10.7494/geol.2021.47.2.59

9. Martínez S, Perez E, Eguia P, Erkoreka A, Granada E. Model Calibration and Exergoeconomic Optimization with NSGA-II Applied to a Residential Cogeneration. *Applied Thermal Engineering*. 2020;169:114916. https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2020.114916

10. Камшилова Ю.А. Семенкин Е.С. Сравнительный анализ эффективности многокритериальных эволюционных алгоритмов SPEA2 и NSGA-II. В: *Тр. XVI Междунар. науч. конф., посвященной памяти генерального конструктора ракетно-космических систем академика М.Ф. Решетнева «Решетневские чтения»*. Ч. 2. Краноярск: Сибирский государственный аэрокосмический университет имени академика М.Ф. Решетнева; 2012. С. 484. URL: https://disk.sibsau.ru/website/reshetnevsite/materials/2012_2.pdf (дата обращения: 17.11.2023).

Kamshilova YuA, Semenkin ES. Comparative Analysis of Multiobjective Evolutionary Algorithms' SPEA2 and NSGA-II Efficiency. In: *Proc. XVI Int. Sci. Conf. dedicated to the memory of the General Designer of rocket and space systems Academician MF Reshetnev "Reshetnev Readings"*. Part 2. Krasnoyarsk: Siberian State Aerospace University named after academician MF Reshetnev; 2012. P. 484. URL: https://disk.sibsau.ru/website/reshetnevsite/materials/2012_2.pdf (accessed: 17.11.2023).

11. Cîrciu MS, Leon F. Comparative Study of Multiobjective Genetic Algorithms. *Bulletin of the Polytechnic Institute of Iasi*. 2010;56(60):1-13. URL: https://www.researchgate.net/publication/228845090 (accessed: 02.03.2024).

12. Koledina KF, Gubaidullin IM, Zagidullin ShG, Koledin SN, Sabirov DSh. Kinetic Regularities of Hydrogenation of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons on Nickel Catalysts. *Russian Journal of Physical Chemistry A*. 2023;97(10):2104–2110. https://doi.org/10.1134/s003602442309008x

13. Загидуллин Ш.Г., Коледина К.Ф. Математическое моделирование кинетики гидрирования полициклических ароматических углеводородов. *Bulletin of BSU*. 2021;26(3):664–669. https://doi.org/10.33184/bulletin-bsu-2021.3.23

Zagidullin ShG, Koledina KF. Mathematical Modeling of the Kinetics of Hydration of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons. *Bulletin of BSU*. 2021;26(3):664–669. https://doi.org/10.33184/bulletin-bsu-2021.3.23

14. Bukhtoyarov SE, Emelichev VA. Stability Aspects of Multicriteria Integer Linear Programming Problems. *Journal of Applied and Industrial Mathematics*. 2019;13:22–29. https://doi.org/10.1134/S1990478919010034

15. Тань Лиго, Новикова С.В. Применение пошагового метода обучения для эволюционного алгоритма в задачах многокритериальной оптимизации. *Вестник Казанского государственного энергетического университета*. 2022;14(3):114–124.

Tan Liguo, Novikova SV. Application of the Step Learning Method for the Evolutionary Algorithm in Problems of Multi-Criteria Optimization. *Vestnik KGEU*. 2022;14(3):114–124.

Об авторах:

Анастасия Александровна Александрова, магистрант кафедры информационных технологий и прикладной математики Уфимского государственного нефтяного технического университета (450064, РФ, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1), SPIN-код: 4026-5240, ORCID, nastena1425@gmail.ru

Сергей Николаевич Коледин, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры информационных технологий и прикладной математики Уфимского государственного нефтяного технического университета (450064, РФ, г. Уфа, ул. Космонавтов, 1), SPIN-код: 4243-6265, ORCID, koledinsrg@gmail.com

Заявленный вклад авторов:

А.А. Александрова — разработка программного обеспечения, подготовка текста, формулировка выводов.

С.Н. Коледин — научное руководство, предоставление исходных данных, корректировка выводов, доработка текста.

Конфликт интересов: авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.

Поступила в редакцию 15.12.2023
Поступила после рецензирования 12.01.2024
Принята к публикации 18.01.2024

About the Authors:

Anastasiya A. Alexandrova, graduate student of the Information Technologies and Applied Mathematics Department, Ufa State Petroleum Technological University (1, Kosmonavtov St., Ufa, 450064, RF), SPIN-code: 4026-5240, ORCID, nastena1425@gmail.ru

Sergey N. Koledin, Cand.Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor of the Information Technologies and Applied Mathematics Department, Ufa State Petroleum Technological University (1, Kosmonavtov St., Ufa, 450064, RF), SPIN-code: 4243-6265, ORCID, koledinsrg@gmail.com

Claimed contributorship:
AA Alexandrova: software development, text preparation, formulation of conclusions.
SN Koledin: academic advising, providing source data, correction of the conclusions, the text revision.

Conflict of interest statement: the authors do not have any conflict of interest.

All authors have read and approved the final version of the manuscript.

Received 15.12.2023
Revised 12.01.2024
Accepted 18.01.2024